

キラル共役分子におけるコヒーレント π 電子回転状態の量子局在化(台湾国立交通大学¹, 台湾原子分子研究所², 東北大・院理³)八巻 昌弘¹, 峯尾 浩文², 寺西 慶哲¹, 藤村 勇一^{1,2,3}, 中村 宏樹¹, 林 聖賢^{1,2}Quantum localization of coherent π -electron rotations in a nonplanar chiral aromatic molecule(Department of Applied Chemistry, Institute of Molecular Science and Center for Interdisciplinary Molecular Science, National Chiao-Tung University, Hsin-Chu 300 Taiwan¹, Institute of Atomic and Molecular Sciences, Academia Sinica, 10617 Taipei, Taiwan², Department of Chemistry, Graduate School, Tohoku University, Sendai 980-8578, Japan³)Masahiro Yamaki¹, Hirofumi Mineo², Yoshiaki Teranisi¹, Yuichi Fujimura^{1,2,3}, Hiroki Nakamura¹, Sheng H. Lin^{1,2}

[序] 超短時間で応答する次世代有機光学素子の開発に寄与するものとして、可視・紫外領域に強い吸収帯をもつ有機分子の π 電子運動をコントロールする研究が注目されている[1]。本研究では最適制御理論を用いて、2つの芳香環が単結合で結びついているキラル共役分子（モデル分子として(*P*)-2,2'-biphenol）につくられたコヒーレント π 電子回転状態をいずれかの芳香環に局在させるレーザー電場を設計する。最適レーザー場とこれによって誘起された電子コヒーレントの時間依存性を解析することにより、 π 電子回転運動の局在化機構を明らかにする。

[本論] 図1(a)は、時計まわり(C)、反時計まわり(A)の π 電子回転運動状態の線形重ね合わせによって片一方のベンゼン環に π 電子回転運動が局在化出来ることを示している。ここで、[]は[L環の回転状態 R環の回転状態]を表わす。左(右側の環)をL(R)と表記する。

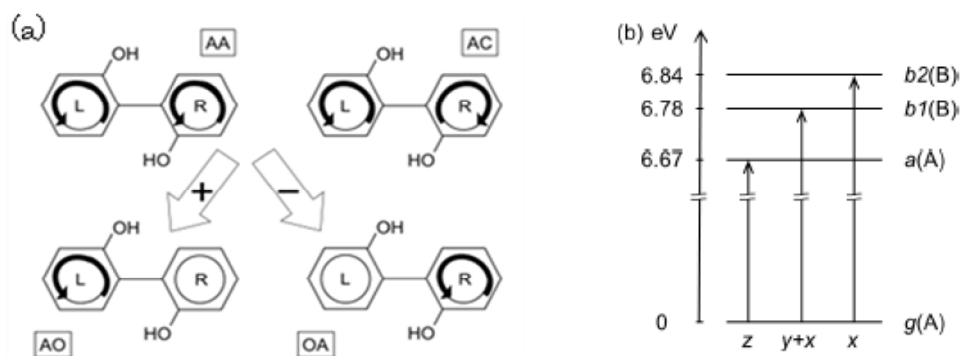
図1. (a) π 電子回転運動の局在化原理、 (b) 局在化に用いる電子励起状態

図1(a)に於いて[AO] と[OA]は、それぞれ、反時計回りの状態がL環とR環に局在

している状態を表す。それらは [AA]と[AC]との in-phase と out-of-phase の重ね合わせで出来ることを示している。[AA]や[AC]回転状態は2つの電子励起状態のコヒーレント励起によってつくられる[2]。

次に、最適制御理論を用いて[A O]および [O A]の局在化計算を行った結果を図2示す。ターゲット時間は30 fs に設定した。ターゲット状態は図1 (b) に示されている3つの励起状態(a, b1,b2)を用いて表わすことが出来る。図2(a) は、時刻30 fs に於いて L 環 (実線) とR環 (破線) では、それぞれ、反時計まわりに回転角運動量 (正の値) を得ていることから、[A O]および [O A]の局在化制御が正当に実行さ

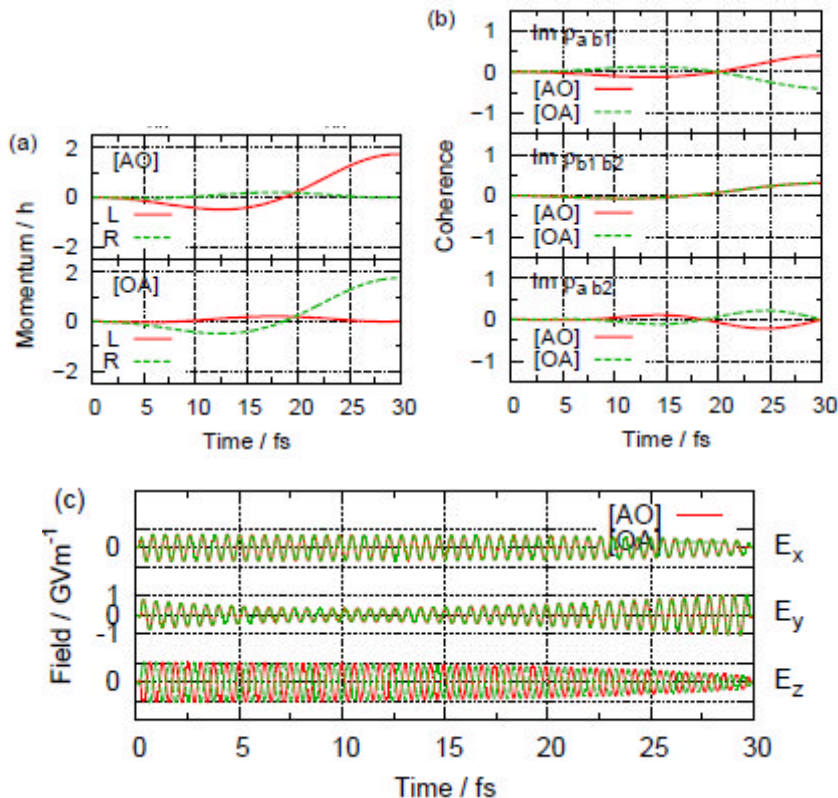


図2. [A O]および [O A]局在化の最適制御計算結果。(a) 回転角運動量の期待値の時間依存性、(b) 最適電場中での電子のコヒーレント運動の時間依存性、電子コヒーレンスの虚部の大きさは環電流の大きさに比例している。(c) 最適制御電場 (E_x , E_y , E_z) の時間依存性。

れたことを示している。

電子コヒーレンスおよび制御電場の詳細な解析結果は当日述べる。

[参考文献]

1. M. Kanno, H. Kono, Y. Fujimura, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 45, 7995(2006); M. Kanno, H. Kono, Y. Fujimura, S. H. Lin, *Phys. Rev. Lett.*, 104, 108302 (2010).
2. H. Mineo, M. Yamaki, Y. Teranishi, M. Hayashi, S. H. Lin, Y. Fujimura, *J. Am. Chem. Soc. Comm.* 134, 14279 (2012); H. Mineo, S. H. Lin and Y. Fujimura, *J. Chem. Phys.* 138, 674304(2013).